

Homogénéisation par une méthode de domaine fictif

D. Choi^a, T. He^b, P. Karamian^c

a. LMNO – Université de Caen, daniel.choi@unicaen.fr

b. LMNO – Université de Caen, philippe.karamian@unicaen.fr

c. LMNO – Université de Caen, tianlong.he@unicaen.fr

Résumé :

Les méthodes d'homogénéisation périodique basées sur une étude asymptotique multi-échelle peuvent être utilisées pour déterminer le comportement effectif d'un matériau composite, via un calcul éléments-finis ou via un calcul dans l'espace de Fourier sur un VER (Volume Élémentaire Représentatif).

Nous proposons une méthode de calcul par éléments-finis alternative originale basée sur une méthode de type domaine fictif, dans lequel le VER est représenté par un maillage structuré tandis que les inclusions sont représentées par des maillages indépendants. Nous validons la méthode via des calculs 3D sur des VER constitués d'inclusions de géométries variées.

Mots clefs : Homogénéisation périodique, Méthode des éléments-finis, domaine fictif

1 Introduction

L'homogénéisation périodique multi-échelle, voir [5, 7], permet le calcul numérique des propriétés effectives de matériaux composites périodique en mécanique, thermique ou encore électriques. Plusieurs techniques de calcul découlant de l'analyse asymptotique multi-échelle existent et ont démontré leur efficacité et leur pertinence, le calcul direct par la méthode des éléments-finis (FEM) [1] et les méthodes itératives utilisant des algorithmes de transformation de Fourier rapide (FFT) [6].

L'homogénéisation est basée sur la notion de Volume Élémentaire Représentatif (VER) du matériau hétérogène, la modélisation (maillage ou image 3d) des VER est donc une problématique essentielle dans ces calculs.

Une des difficultés avec les méthodes d'éléments-finis est la création d'un maillage conforme du VER, compatible avec des conditions aux limites périodiques, ce qui est une tâche tout à fait non triviale. Par ailleurs, la génération automatique de tels maillages de VER par exemple avec des algorithmes usuels engendre en outre des maillages de très grandes tailles dès lors que le nombre d'inclusions devient important.

Les méthodes FFT n'utilisent pas de maillage mais une image 3D du composite qui est donc modélisée par une voxelisation, l'hétérogénéité étant définie voxel par voxel. Cette technique est très intéressante

puisqu'elle permet de calculer des propriétés effectives à partir des images des vraies composites (obtenues par exemple par tomographie), en passant par des outils de segmentation d'image.

Malgré l'efficacité démontrée de ces méthodes, il subsiste des cas où le calcul est rendu difficile lorsque la forme ou la taille des inclusions engendre des maillages ou des images de VER de taille extrêmement importante. Il n'est pas rare de devoir traiter des images de dimension extrêmement importante ($> 10^7$ voxels).

2 Homogénéisation périodique

Nous rappelons brièvement ici le principe de l'homogénéisation périodique [5, 7] et la mise en oeuvre du calcul des propriétés effectives par la méthode des éléments-finis[1]. Pour simplifier l'exposé, nous choisissons de considérer le problème du calcul des propriétés thermique effectives ou homogénéisées d'un matériau hétérogène périodique : La loi de conductivité thermique s'écrit :

$$\underline{q} = A \underline{\nabla} u \quad (1)$$

où u désigne la température et \underline{q} le flux de température, la matrice de conductivité A est périodique de période εP .

Chaque période εP constitue le Volume Élémentaire Représentatif. Pour fixer les idées, nous choisissons $P = [0, 1]^3$. Aux variables d'espace $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$, on associe les variables locales ou microscopiques

$$\underline{y} = \frac{1}{\varepsilon} \underline{x} \in P.$$

L'écriture d'un développement asymptotique :

$$\underline{q} = \underline{q}^0 + \varepsilon \underline{q}^1 + \dots \quad (2)$$

$$u = u^0(\underline{x}) + \varepsilon u^1(\underline{y}) + \dots \quad (3)$$

avec u^0 ne dépendant que de \underline{x} et u^1 périodique de période P , montre alors qu'une équation "locale" doit être satisfaite :

$$\operatorname{div}_y(\underline{q}^0) = 0 \quad \text{dans } P. \quad (4)$$

d'où

$$\int_P \underline{q}^0 \underline{\nabla}_y(u^*) = 0 \quad \forall u^* \in H_{per}^1(P)$$

où $H_{per}^1(P)$ désigne l'espace de Sobolev H^1 de fonctions définies et périodiques sur P .

En prenant la moyenne $\langle \underline{q}^0 \rangle$ sur la période P , on a

$$\langle \underline{q}^0 \rangle = A^h \underline{\nabla} u^0, \quad (5)$$

En posant, $\underline{E}^0 = \underline{\nabla}_x u^0$ et $\underline{E}^* = \underline{\nabla}_y u^*$ on a pour tout $u^* \in H_{per}^1(P)$:

$$\begin{aligned} \langle \underline{q}^0 \rangle \underline{E}^* &= A^h \underline{\nabla} u^0 \cdot \underline{E}^* \\ &= \int_P A(\underline{E}^0 + \underline{\nabla}_y u^1)(\underline{E}^* + \underline{\nabla}_y u^*) \end{aligned}$$

autrement dit :

$$\int_P A(\underline{E}^0 + \nabla_y u^1) \cdot (\underline{E}^* + \nabla_y u^*) = A^h \underline{E}^0 \cdot \underline{E}^* \quad \forall u^* \in H_{per}^1(P), \underline{E}^* \in \mathbb{R}^3. \quad (6)$$

La résolution des trois problèmes (6) pour $A^h \underline{E}^0$ parcourant \mathbb{R}^3 , permet d'obtenir la matrice de conductivité homogénéisée A^h . Les problèmes variationnels (6) sont bien posés et leur solutions peuvent être approchées par la méthode des éléments finis.

La principale difficulté technique de la méthode des éléments finis pour ce type de problème avec un VER constitué d'une matrice et de multiples inclusions est la création d'un maillage conforme telle que les conditions aux limites périodiques puissent être implémentées simplement. En outre, de tels maillages nécessitent un nombre d'éléments très importants dès lors que le nombre d'inclusions est grand et/ou que les inclusions ont une géométrie fine. Avec la méthode des éléments finis, ces difficultés peuvent être contournées suivant deux méthodologies : d'une part, il est possible de générer de façon optimale les maillages des inclusions[8], d'autre part il est possible d'utiliser des méthodes XFEM avec une technique "level-set" pour modéliser les inclusions [9].

La méthode alternative que nous présentons nous permet de nous affranchir également de ces deux difficultés, elle consiste très simplement à dissocier le maillage du VER des maillages des inclusions, autrement dit, utiliser un principe de domaine fictif.

3 Méthode des domaines fictifs

La méthode des domaines fictifs est une technique particulière utilisée pour résoudre des problèmes aux limites elliptiques avec des domaines à bord ou interfaces compliqués pour lesquels la création ou la répétition de création de maillage peut être difficile ou couteuse. Pour y remédier différents maillages indépendants sont considérés : un maillage principal englobant le domaine tout entier (et en général structuré) et les maillages des interfaces ou des inclusions.

En général, il en découle un problème d'optimisation sous contrainte ou de façon équivalente la résolution d'un système dans lequel les relations entre les différents maillages ou bien les conditions aux limites sont introduites avec l'aide de multiplicateurs de Lagrange, voir [3].

La méthode que nous proposons est de ce point de vue différente des méthodes de domaines fictifs usuels. L'utilisation d'éléments isoparamétriques et d'un maillage structuré permet de relier très simplement les deux maillages par l'intermédiaire d'une matrice d'interpolation des noeuds des maillages des inclusions vers les nœuds du maillage du VER.

Sur le VER P , considérons la forme d'énergie définie dans le problème (6) :

$$J(u, \underline{E}) = \int_P A(\underline{E} + \nabla_y u) \cdot (\underline{E} + \nabla_y u) \quad (7)$$

Pour fixer les idées supposons que le VER P est constitué de deux milieux homogènes : la matrice et une inclusion, dont les matrices de conductivité sont respectivement notées A_m et A_s . Désignons le domaine définissant l'inclusion par S . On a

$$A(y) = \begin{cases} A_m & \text{in } P \setminus S \\ A_s & \text{in } S. \end{cases}$$

Nous pouvons donc réécrire :

$$J(u, \underline{E}) = \int_{P \setminus S} A_m(\underline{E} + \nabla_y u) \cdot (\underline{E} + \nabla_y u) + \int_S A_s(\underline{E} + \nabla_y u) \cdot (\underline{E} + \nabla_y u) \quad (8)$$

Le principe des domaines fictifs consiste à définir deux maillages différents et indépendants, dans une certaine mesure, qui vont représenter P et S :

$$J(u, \underline{E}) = \underbrace{\int_P A_m(\underline{E} + \nabla_y u) \cdot (\underline{E} + \nabla_y u)}_{J_m} + \underbrace{\int_S (A_s - A_m)(\underline{E} + \nabla_y u) \cdot (\underline{E} + \nabla_y u)}_{J_s} \quad (9)$$

Sur un maillage conforme donné du VER P , définissons l'espace d'interpolation V^h de dimension n de sorte que tout $u^h \in V^h$ puisse être représenté par $\hat{u} \in \mathbb{R}^n$. La forme J_m puisse être définie par une matrice K_m :

$$J_m(u^h, \underline{E}) = \int_P A_m(\underline{E} + \nabla_y u^h) \cdot (\underline{E} + \nabla_y u^h) = \hat{u}^\top K_m \hat{u}. \quad (10)$$

Considérons maintenant un maillage conforme de l'inclusion S et définissons y de même un espace d'interpolation W^l de dimension p , et tout v^l est représentée par $\hat{v} \in \mathbb{R}^p$. La forme J_s peut être représentée dans W^l par une matrice K_s :

$$J_s(v^l, \underline{E}) = \int_S (A_s - A_m)(\underline{E} + \nabla_y v^l) \cdot (\underline{E} + \nabla_y v^l) = \hat{v}^\top K_s \hat{v}. \quad (11)$$

En choisissant des éléments-finis isoparamétriques, nous pouvons facilement décrire les nœuds du maillage de l'inclusion en fonction des nœuds du maillage du VER :

Pour chaque composante v_i de \hat{v} , nous avons $v_i = v(N_i)$ où N_i est un nœud du maillage de l'inclusion S . Considérons E_l , l'élément du maillage du VER P dans lequel est inclus le nœud N_i et soient \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} les vecteur de coordonnées des nœuds (sommets) définissant l'élément E_l . Un choix d'élément-fini isoparamétrique définit un élément de référence et des fonctions de base $\hat{\Phi}$ (définissant l'interpolation polynomiale). Soient x, y, z les coordonnées du nœud N_i , nous pouvons calculer les coordonnées (r, s, t) dans l'élément de référence de N_i dans E_l . On a alors

$$\begin{aligned} x &= \hat{\Phi}(r, s, t)^\top \hat{x} \\ y &= \hat{\Phi}(r, s, t)^\top \hat{y} \\ z &= \hat{\Phi}(r, s, t)^\top \hat{z} \end{aligned}$$

On en déduit alors que

$$v_i = v(x, y, z) = \hat{\Phi}(r, s, t)^\top \hat{u} \quad (12)$$

où on commet l'abus d'écriture pour désigner par \hat{u} les valeurs de la fonction v aux nœuds de l'élément E_l . Prolongeons par 0 la relation (12) à tous les nœuds du maillage du VER P et notons par C_i la matrice de dimension $1 \times n$:

$$v_i = v(x, y, z) = C_i \hat{u}$$

Ainsi, pour tous les nœuds du maillage de S nous obtenons une matrice C dont chaque ligne est définie comme C_i et les reliant au nœud du maillage de P :

$$\hat{v} = C \hat{u}. \quad (13)$$

Nous obtenons ainsi

$$J_s = \hat{v}^\top K_s \hat{v} = \hat{u}^\top C^\top K_s C \hat{u}, \quad (14)$$

et finalement :

$$J(u, \underline{E}) = \hat{u}^\top (K_m + C^\top K_s C) \hat{u}. \quad (15)$$

Ainsi les solutions des problèmes (6) permettant la détermination des coefficients effectifs peuvent être approchés par la discrétisation (14).

Dans le cas d'inclusions multiple, il suffit de reproduire la procédure précédente pour chaque inclusion. Il est également possible de choisir différents types de maillages pour les différentes inclusions. Tous ces calculs peuvent naturellement être réalisés en parallèle, cela peut être utile si les maillages retenus pour les inclusions sont très fins.

A priori, la détermination de la matrice de "passage" (13) du maillage de l'inclusion vers le maillage du VER peut être difficile pour des maillages non-structurés. Cette difficulté relative est complètement levée dans le cas d'un maillage structuré du VER couplé avec l'utilisation d'éléments isoparamétriques usuels. C'est par exemple le cas d'un maillage hexaédrique régulier à 8 nœuds pour lequel, pour tout point du VER, nous déterminons l'élément du maillage le contenant par une simple formule.

De plus, avec un tel maillage les conditions de périodicité peuvent aisément être imposées par une méthode de substitution, ce qui a le double avantage de garder un système symétrique défini positif et de réduire le nombre d'inconnues à traiter. La méthode décrite est donc extrêmement simple à mettre en œuvre et économique.

4 Tests Numériques

Pour valider la méthode, nous procédons à quelques tests numériques sur des exemples élémentaires de VER avec une unique inclusion pour lesquels nous avons des solutions de référence.

Les calculs sont effectués sur un ordinateur ordinaire avec une programmation en langage Fortran et Python. La librairie PETSc¹ est utilisée pour la résolution des systèmes linéaires. Le code éléments finis utilisé est une librairie CFEM, développée par les auteurs. Les maillages des inclusions sont réalisés avec l'aide du logiciel Gmsh [2].

Sur ces tests, nous avons choisi des maillages hexaédriques à 8 nœuds pour les inclusions. Les VER sont maillés de façon structurée en n subdivisions régulières des cotés du pavé $[0, 1]^3$, un maillage hexaédrique $n \times n \times n$ est caractérisé dans les figures par le "diamètre" des éléments égal à $h = 1/n$. Ainsi le maillage d'un VER avec $n = 10$ est constitué de 1000 éléments et 1334 degrés de liberté (ddl), avec $h = 10^{-1}$.

Dans ce papier, nous nous contentons de deux configurations élémentaires : une inclusion sphérique et une inclusion cubique voir la Figure 1. Pour fixer les idées, nous avons normalisé les coefficients de conductivité et nous avons choisi un contraste de 1 pour 100 entre les coefficients de la matrice et les coefficients de l'inclusion.

1. Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation : <https://www.mcs.anl.gov/petsc>

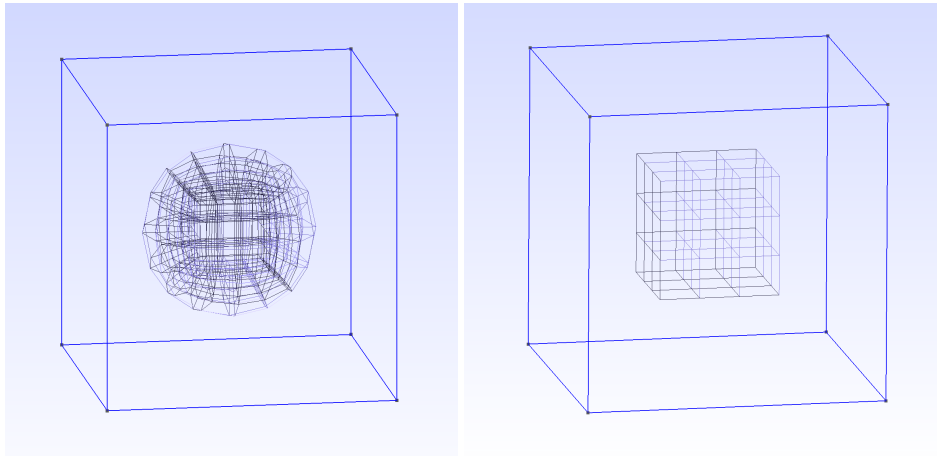


FIGURE 1 – Deux inclusions sphérique (gauche) et cubique (droite) maillées en hexaèdre dans leur VER

Cas d'une inclusion sphérique

Nous commençons par une inclusion unique sphérique. Le rayon choisi ($r = 0.3$) correspond à une fraction volumique égale à 0.1131. Dans ce cas, lorsque la fraction volumique n'est pas trop importante, le modèle Mori-Tanaka basé sur les tenseurs d'Eshelby peut servir de référence [4].

Sur la Figure 2, nous traçons les erreurs relatives à une telle solution de référence, pour plusieurs maillages de l'inclusion différenciés par le paramètre nm qui définit la finesse du maillage : plus nm est grand, plus le maillage de l'inclusion est fin. $nm = 30, 50, 80$ correspond respectivement à différents maillages de l'inclusion avec $1.5 \cdot 10^5$, $7 \cdot 10^5$, et $3 \cdot 10^6$ degrés de libertés (ddl). La valeur $nm = 50$ garantit un maillage de l'inclusion plus fin que le maillage du VER jusqu'à $h = 10^{-2}$.

Sur cette figure, nous observons pour les trois courbes une convergence quasi-linéaire par rapport au diamètre des éléments du maillage structuré du VER. Il faut toutefois observer que plus le maillage du VER est fin, plus le maillage des inclusions doit également être fin : on note une légère inflexion de la pente de la courbe correspondant à $nm = 30$, lorsque les maillages de VER sont plus fins ($h < 10^{-2}$) ; cela correspond à un croisement de courbes plutôt qu'une meilleure approximation. C'est une caractéristique habituelle avec les méthodes de domaines fictifs, le maillage des inclusions doit être plus fin que celui du VER, même si dans ce cas, les résultats apparaissent paradoxalement meilleurs.

Cas d'une inclusion cubique

Dans le cas cubique, le maillage de l'inclusion peut, dans un cas précis, coïncider avec le maillage du VER. Dans cette configuration, la méthode des domaines fictifs coïncide avec une méthode d'éléments finis usuelle. Nous pouvons alors dans ce cas précis évaluer l'erreur commise par la méthode de domaine fictif par rapport à une méthode d'éléments-finis classique. Par ailleurs, dans une telle configuration les méthodes itératives basées sur la FFT donnent en principe une solution quasi-exacte puisque la géométrie est exactement reproduite par la voxelisation, voir [6]. Ainsi si par exemple nous considérons une inclusion cubique de coté 0.5, nous pouvons considérer des voxelisations en multiple de 4 subdivisions (8, 16, 32, 64, etc) le calcul FFT (avec une voxelisation 128^3) est alors considérée comme une solution de référence. Sur la Figure 3, nous traçons l'évolution de l'erreur relative du calcul du coefficient ther-

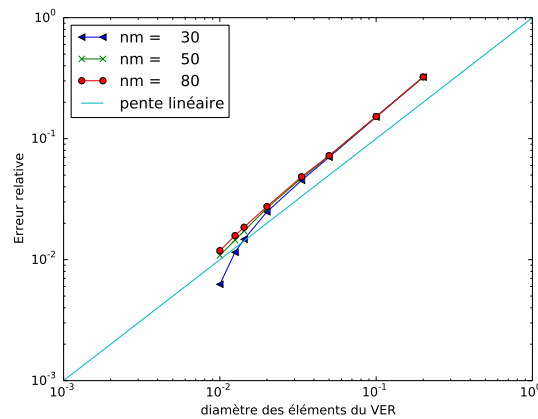


FIGURE 2 – Erreur relative des coefficients thermiques homogénéisés pour une inclusion sphérique de rayon 0.3 pour différents maillages de l’inclusion.

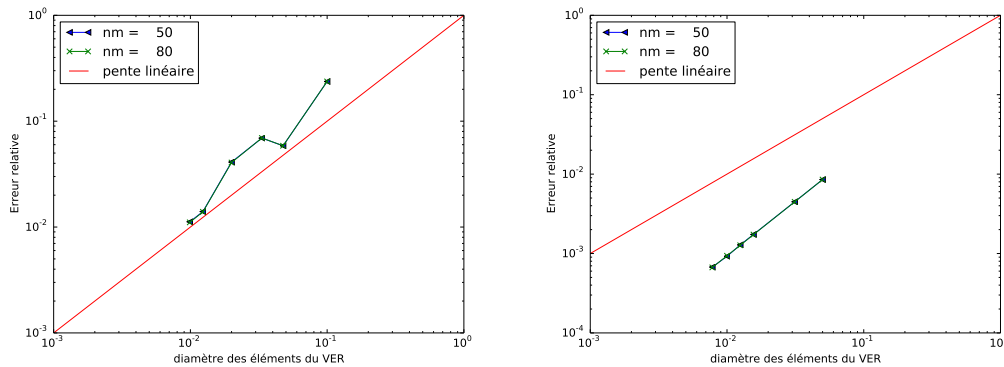


FIGURE 3 – Erreur relative des coefficients thermiques homogénéisé pour une inclusion cubique de coté 0.5 pour différents maillages de l’inclusion : VER aux subdivisions non multiples de 4 (à gauche) et VER aux subdivisions multiples de 4 (à droite).

mique homogénéisé selon le maillage du VER. Nous avons différencié à droite les évolutions pour les maillages pour lesquels l’inclusion cubique peut être représentée entièrement par les éléments du VER et à gauche ceux dont les éléments ne définissent pas l’inclusion. Dans les deux cas nous notons une convergence qui semble linéaire mais avec une différence notable dans l’ordre de grandeur des erreurs relatives. La différence correspond à l’erreur commise par notre méthode utilisant des domaines fictifs par rapport à un calcul élément finis pur. Nous notons que dans ce cas simple, l’erreur de la méthode par domaine fictif est de 1% pour le maillage le plus fin ($n = 101$), un ordre de grandeur analogue au cas d’une inclusion sphérique.

Conclusion

Nous avons présenté une méthode alternative originale de calcul des propriétés effectives de matériaux hétérogènes périodiques, utilisant une technique de domaine fictif.

Les tests numériques ont montré une convergence au moins linéaire, par rapport aux maillages du VER, des erreurs relatives par rapport à une solution de référence. Ce sont des taux de convergence attendus

compte tenu du choix d'interpolation linéaire.

Ces résultats sont encourageants et de nombreux développements sont en cours : utilisation de différents types d'éléments, amélioration des performances par enrichissement des éléments. La méthode est très simple à mettre en œuvre, elle est pertinente pour des cas de matériaux pour lesquels les inclusions ont une structure complexe à modéliser soit par le maillage soit par la voxelisation, elle permet de considérer des inclusions de forme réellement arbitraire.

Références

- [1] Debordes, O. Homogenization Computations in the Elastic or Plastic Range ; Applications to Unidirectional Composite and Perforated Sheets Computational Mechanics Publications, 1986, 453-458
- [2] Geuzaine, C. et Remacle, J.-F. Gmsh : a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. 79(11), . International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2009, 79, 1309-1331
- [3] R. Glowinski, T. Pan et J. Periaux A fictitious domain method for Dirichlet problem and applications. Computational Methods Applied to Mechanical Engineering., 1994, 111, 283-303
- [4] Hatta, H. et Taya, M. Equivalent inclusion method for steady state heat conduction in composites International Journal of Engineering Science, 1986, 24, 1159-1170
- [5] Bensoussan, A. ; Lions, J.-L. et Papanicolaou, G. Asymptotic analysis for periodic structures, North-Holland Publishing Company Amsterdam, 1978, 5
- [6] Moulinec, H. et Suquet, P. A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série II, Mécanique, physique, chimie, astronomie, Elsevier, 1994, 318, 1417-1423
- [7] Sanchez-Palencia, E. et Sanchez-Hubert, J. Introduction aux méthodes asymptotiques et à l'homogénéisation - Application à la mécanique des milieux continus Masson, 1992
- [8] Schneider, K. ; Klusemann, B. et Bargmann, S. Automatic three-dimensional geometry and mesh generation of periodic representative volume elements for matrix-inclusion composites Advances in Engineering Software, Elsevier, 2016, 99, 177-188
- [9] Sukumar, N. Chopp, D. L. Moës, N. et Belytschko, T, Modeling holes and inclusions by level sets in the extended finite-element method Computer methods in applied mechanics and engineering, Elsevier, 2001, 190, 6183-620